

h-BN Graphene 합성에 의한 태양열전지

최홍영, 우준혁

서울대학교 물리천문학부

philphya@gmail.com

Graphene의 bandgap이 0eV이고 hBN의 bandgap이 4~5eV라는 이기 때문에 두 물질을 혼합하였을 때 태양전지로 쓰기 좋은 1.2eV의 bandgap을 가지는 물질을 만들 수 있을거라 생각된다. 이 점을 착안하여 hBN에 Carbon을 도핑시켜 1.2eV의 bandgap을 갖는 물질을 이론적으로 만들어 보았다.

INTRODUCTION

이상적인 태양전지의 경우 1.2eV정도의 bandgap을 가져야 한다. 하지만 graphene의 경우에는 bandgap이 0eV이고 hexagonal boron nitride(h-BN)의 경우에는 이론적 밴드갭이 대략 4.66eV 정도 이다.[1] 그러므로 이 두 물질을 조합하면 bandgap이 1.2eV에 가까운 물질을 만들어 낼 수 있을것으로 보인다. Band 구조는 Density Functional Theory를 기반으로한 소프트웨어로 계산하였다.

CALCULATION METHODS

계산도구는 EDISON 나노물리에 기재된 Linear Combination of Atomic Orbitals 기반 Density Functional Theory 전자구조계산 SW를 사용하였다. 계산에 사용된 모든 Pseudo Potential은 LDA를 사용하였으며 시스템의 에너지를 최소화 시키는 방향으로 원자를 움직여서 계산하는 Optimization 옵션을 사용하였다.

Fig. 1. 에서 보이듯이 18개의 원자들로 Basis Cell을 구성하여 계산에 이용하였다. 원자들 옆에 써져있는 숫자는 structure input file의 atomic index들이고 앞으로 몇번원자를 Carbon으로 치환해 주었는지 를 Fig. 1.의 숫자들로 표현하였다.

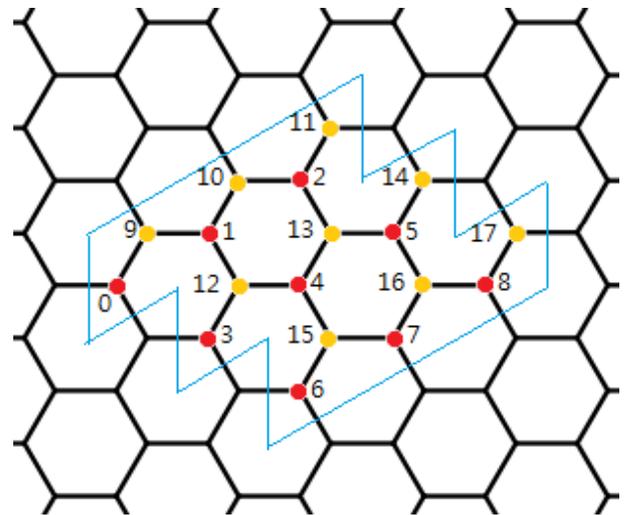


Fig. 1. 18 atoms Basis Cell 노란색이 Boron이고 붉은색이 Nitrogen이다.

EDISON 소프트웨어의 정확성을 검증하기 위해 총 15개의 graphene, hBN합성물질에 대하여 계산후 다른 논문과 비교하였다.[3] Table. 1.은

	bandgap		bandgap		bandgap
a	0.0002	f	1.1096	k	0.4757
b	1.0858	g	1.0636	l	0.61023
c	0.6143	h	2.1987	m	1.9282
d	4.5701	i	3.6331	n	0.9282
e	0.3528	j	1.7407	o	0.6546

Table. 1.

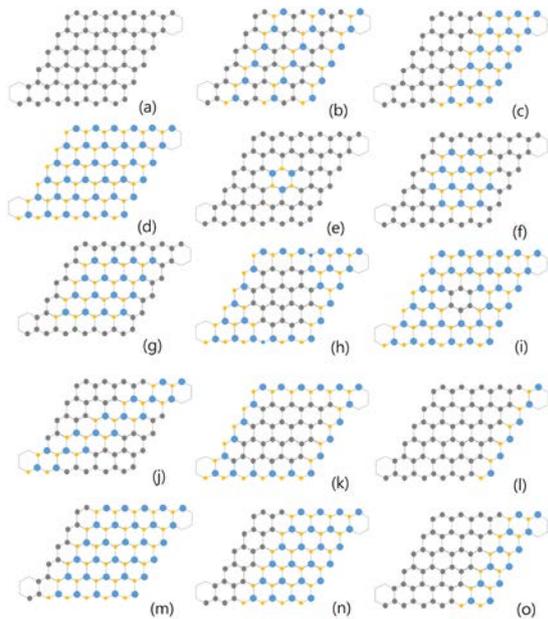


Fig. 2.

Fig. 2.에 대하여 각각 계산한 결과이다. Table. 2.의 결과는 참고문헌[3]의 결과와 매우 비슷하였으나 k, l, o의 경우 20~30%로 오차가 크다는 것을 알 수 있다. 이것은 EDISON 소프트웨어로 self consistent 하게 계산을 하면서 local minimum으로 값이 수렴해버린 것이라 생각된다.

RESULTS AND DISCUSSION

APPENDIX의 Table. 3. 을 보면 1.2eV에 가까운 값이 0-1-13-17, 0-2-12-16 원자를 Carbon으로 치환해준 물질에서 나타난다는 것을 알 수 있다. 하지만 실험적으로 hBN의 bandgap은 5.971eV이기 때문에 실험값에 맞춰 보정을 해주기 위해 1.22정도를 EDISON 소프트웨어로

C doping	bandgap(eV)
0-1-13-15	1.280268
0-1-13-16	1.249158
0-1-15-16	1.228906
0-1-15-17	1.228906

Table. 2.

계산한 bandgap 결과에 곱하였다.[2]

Table. 2.는 보정후 bandgap이 1.2eV 근처인 물질들을 모은것이다. 이 물질들은 0-1-13이나 0-1-15번 원자들이 탄소로 치환 되었고 13,15번의 second nearest neighbour에 다시 탄소가 하나 더 치환 되었다. 0-1 또한 second nearest neighbour이기 때문에 second nearest neighbour가 두번 들어간 경우가 bandgap을 1.2정도로 낮춰주는 경향을 보인다는 것을 알 수 있다.

이는 graphene과 hBN의 합성물의 bandgap이 graphene region width가 증가함에 따라 감소하기 때문에 생기는 현상이라 생각된다.[3] Secon nearest neighbour 끼리 Carbon을 도핑시켰을 때에 nearest neighbour 끼리 도핑시킨것보다 폭이 넓어지기 때문이다.

CONCLUSION

결과 토의 부분에서 보았듯이 hBN에의 두 second nearest neighbour 위치에있는 두 Carbon의 관계가 bandgap을 효과적으로 낮춰줄 수 있었다.

ACKNOWLEDGEMENT

본 논문을 쓰기 위해 정확도가 높은 소프트웨어를 제공해준 EDISON 나노물리센터와 학술적 조언을 해주신 서울대학교 물리천문학부 유재준 교수님에게 감사를 표한다.

APPENDIX

eV	Bandgap	Optimized bandgap
BN	4.5739	4.5711
0-9	2.8424	2.9545
0-10	1.6042	1.8444
0-12	1.6735	1.9015
0-1-9-12	2.1700	2.2657
0-3-9-12	2.4830	2.6612
0-1-9-10	2.2129	2.3212
0-1-9-15	1.4264	1.5946
0-1-9-13	1.3285	1.4371
0-1-9-17	1.1813	1.3008
0-3-9-10	1.3578	1.6618
0-3-9-13	1.2966	1.5511
0-3-9-15	1.5112	1.7789
0-3-9-16	1.4328	1.6558
0-3-9-17	1.9955	2.1325
0-2-9-10	2.5833	2.7829
0-2-9-13	1.9954	2.1243
0-2-9-16	1.4803	1.7867
0-2-9-17	1.2744	1.4940
0-1-13-15	0.8230	1.0494
0-1-13-16	0.8241	1.0239
0-1-13-17	0.9330	1.2168
0-1-15-16	0.7317	1.0073
0-1-15-17	0.7434	1.0073
0-2-12-16	0.9330	1.2161

Table. 3.

Nat. Mater. 3, 404 (2004)

[3] Prashant P. Shinde, Vijay Kumar,

Phys. Rev. B 84, 125401 (2011)

REFERENCES

[1] F. W. Averill, J. R. Morris, and V. R. Cooper,
Phys. Rev. B 80, 195411 (2009).

[2] K. Watanabe, T. Taniguchi, H. Kanda,